



TITLE:

化学反応と電子物性に関する理論的研究

AUTHOR(S):

笛野, 博之

CITATION:

笛野, 博之. 化学反応と電子物性に関する理論的研究. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2013, 2012: 104-104

ISSUE DATE:

2013-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/173959>

RIGHT:

化学反応と電子物性に関する理論的研究

Theoretical Studies of Chemical Reaction and Electronic Properties

工学研究科分子工学専攻量子機能化学講座 笛野 博之

背景と目的

カーボンナノチューブやグラフェンシート等の低次元炭素材料は、構造因子制御による物性変化、及び化学修飾による機能付加により特異な性質変化を示すことから、次世代エレクトロニクス材料として多くの期待が寄せられている。Fig. 1のナノグラフェン構造に示すように、これらナノ炭素材料にはベンゼン環構造が多く含まれている。これらのベンゼン環の持つ芳香族性は化合物の安定性や導電性に関わる重要な目安の一つになる。本研究では、様々な形状や大きさを持つナノ炭素材料における各々のベンゼン環の芳香族性を理論計算から得られたNICS値を用いて解析を行った。

結果と考察

本研究では、密度汎関数法 B3LYP 法を用い、基底関数を 6-31G**として構造最適化を行った。芳香族性は、NICS 値(Nucleus-Independent chemical shift)を用いて評価した。NICS 値は負の値で絶対値が大きい所が芳香族性が大きいことに対応する。すべての理論計算には Gaussian09 プログラムパッケージを用いた。

Fig. 1 には Armchair 型エッジを持つナノグラフェンと炭素欠陥を有するナノグラフェンの炭素骨格図を示す。また、炭素欠陥の末端にある炭素には水素原子を結合させている。付表は、Fig. 1 に示した各仮想原子位置における分子平面上から直交方向上方に 1 Å の位置での NICS 値を示す。こちらの解析結果では、ナノグラフェンと炭素欠陥有のナノグラフェンの NICS 値の違いを見る事ができた。また炭素欠陥上においても NICS 値は負の値をとっており、芳香族性は保たれていると考えられる。

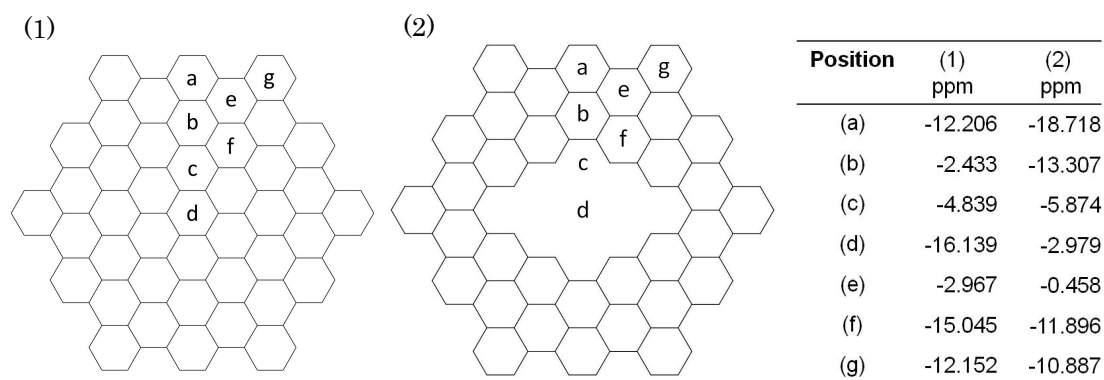


Fig. 1 Nanographene models, (1) nanographene, (2) holey nanographene.

参考文献

H. Fueno, Y. Kobayashi and K. Tanaka, *Science China Chemistry*, **55**, 796(2012).

L. Li, T. Fukawa, T. Matsuo, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, K. Tamao, *Nature Chemistry*, **4**, 361(2012).